Index

Pagina

Commentationes

ALLINGER, NORMAN L., JULIA CHOW TAI, and THOMAS W. STUART: The Electronic Spectra of Unsaturated Hydrocarbons. A VESCF-CI Treatment 101
AMOS, A. T.: Self-Consistent Perturbation Theory for Conjugated Molecules. V. Calculation of Bond Polarizabilities, Bond Lengths and Force Constants 91
ARMSTRONG, D. R., and P. G. PERKINS: Self-Consistent Molecular Orbital Calculations on Organoboron Compounds. V. Triarylboranes 138

BELL, J. J., see FLURRY, R. L., Jr., and E. W. STOUT 203
BERTHOD, H., CL. GIESSNER-PRETTRE et A. PULLMAN: Sur les rôles respectifs des électrons σ et π dans les propriétés des dérivés halogénés des molécules conjuguées. Application à l'étude de l'uracile et du fluorouracile 212
BINGEL, W. A.: A Physical Interpretation of the Cusp Conditions for Molecular Wave Functions 54
BISHOP, D. M.: Molecular Orbital Energy Levels for the Sulfate Ion 285
BLOOR, J. E., B. R. GILSON, and N. BREARLEY: A Comparative Study of SCFMO Calculations on Alternant and Nonalternant Hydrocarbons 35
BREARLEY, N., see BLOOR, J. E., and B. R. GILSON 35
BÜTI, GY.: A Semiempirical Method for Treating Unsaturated Molecules in Terms of Electron Pair Functions 367

CAILLET, J., see PULLMAN, B. 223
CAPELLO, D., and A. PULLMAN: The Use of Improved Atomic Orbitals in the Evaluation of Zero-Field Splitting Integrals 383
CASALONE, G. L., C. MARIANI, A. MUGNOLI, and M. SIMONETTA: Crystal, Molecular and Electronic Structure of 1,1-diaryl-2-halogenoethylenes. III. Semiempirical Calculations on the Crystal, Molecular and Electronic Structure of 2-bromo-1,1-diphenyl-prop-1-ene 228
CLAVERIE, P., see DINER, S., and J. P. MALRIEU 390
— see MALRIEU, J. P., and S. DINER 404
CSIZMADIA, I. G., see SEUNG, S. S., and M. C. HARRISON 281

DAUDEL, R., voir VEILLARD, A., B. LEVY et F. GALLAIS 312
DE GIAMBIAGI, M. S., and M. GIAMBIAGI: An Analysis of the Polarizabilities in Some Conjugated Molecules 341
DINER, S., J. P. MALRIEU, and P. CLAVERIE: The Use of Perturbation Methods for the Study of the Effects of Configuration Interaction. II. Variation of the 2^{nd} Order Energy Correction in the Series of Linear Polyenes and Polyacenes 390
—, see MALRIEU, J. P., and P. CLAVERIE 404

FLURRY, R. L., Jr., E. W. STOUT, and J. J. BELL: The Inclusion of Non-nearest Neighbor β Terms in Pariser-Parr-Pople Type S.C.M.O. Calculations. II. Heteroatomic Systems 203
FRANÇOIS, PH., voir JULG, A. 249
FRATEV, F., s. TYUTYULKOV, N., u. D. PETKOV 236

GALLAIS, F., voir VEILLARD, A., B. LEVY et R. DAUDEL 312
GIAMBIAGI, M., see DE GIAMBIAGI, M. S. 341
GIESSNER-PRETTRE, CL., voir BERTHOD, H., et A. PULLMAN 212
GILSON, B. R., see BLOOR, J. E., and N. BREARLEY 35
GOMBÁS, P.: On the Correction of Exchange Potentials 157
GOUTERMAN, M., see ZERNER, M. 26

HARRISON, M. C., see SEUNG, S. S., and I. G. CSIZMADIA 281
HINCHLIFFE, A.: An Omega Technique Study of Proton Hyperfine Coupling Constants 300

Pagina

Hosoya, H., and S. Nagakura: The Electronic Structure and Spectrum of Tropone . . 319
Hudson, R. F., see Klopman, G. 165

Julg, A., et Ph. François: Recherches sur la géométrie de quelques hydrocarbures non-alternants: son influence sur les énergies de transition, une nouvelle définition de l'aromaticité 249

Kadura, P.: Modellrechnungen zur symmetrischen Vierzentrenbindung. II 292
Klopman, G., and R. F. Hudson: Polyelectronic Perturbation Treatment of Chemical Reactivity 165
Koutecký, J.: Approximate Pairing Properties of SCF Solutions in Highly Symmetric Heteroatomic Systems 244
Kvlividze, V. A., see Voronin, A. I. 334

Ladik, J., see Moseley, Jr., Wm. D., and O. Mårtensson 18
Land, D. R., and F. L. Pilar: On Certain Charge Distribution Anomalies in Conjugated Heteroatomic Molecules 161
La Paglia, S. R.: Theoretical Electronic Transition Probabilities of Heteronuclear Diatomic Molecules 185
Levy, B., voir Veillard, A., R. Daudel et F. Gallais 312
Lin, S. H.: Study of the Non-Adiabatic Transitions with Application to NO 1

Malrieu, J. P., see Diner, S., and P. Claverie 390
—, P. Claverie, and S. Diner: Use of Perturbation Methods for the Study of Configuration Interaction Effects. III. The Second Order Corrections to Transition Energies 404
Mariani, C., see Casalone, G. L., A. Mugnoli, and M. Simonetta 228
Mårtensson, O., see Moseley, Jr., Wm. D., and J. Ladik 18
Melrose, M. P., and Robert G. Parr: Some Integral Hellmann-Feynman Calculations on Hydrogen Peroxide and Ammonia 150
Meyer, Amatzya Y., and Josiane Serre: Multi-Conformational Compounds with Two Absorbing Groups. I 117
Moccia, R.: Optimization of the Basis Functions in SCFMO Calculations Optimized One-Center SCF MO Basis Set for HCl 8
— Perturbed SCF MO Calculations. Electrical Polarizability and Magnetic Susceptibility of HF, H_2O, NH_3 and CH_4 192
Moseley, Jr., Wm. D., J. Ladik, and O. Mårtensson: On the Propagation of Errors in Hückel-Wheland Molecular Orbital Calculations 18
Mugnoli, A., see Casalone, G. L., C. Mariani, and M. Simonetta 228

Nagakura, S., see Hosoya, H. 319
Narasimhan, P. T., see Ray, N. K. 306

Parr, Robert G., see Melrose, M. P. 150
Pellégatti, A.: Recherches théoriques sur la structure électronique de molécules contenant des atomes hybridés en *sp*. V. L'allène 128
Perkins, P. G., see Armstrong, D. R. 138
Petkov, D., s. Tyutyulkov, N., u. F. Fratev 236
Pilar, F. L., see Land, D. R. 161
Pullman, A., voir Berthod, H., et Cl. Giessner-Prettre 212
— see Capello, D. 383
Pullman, B., and J. Caillet: Van der Waals-London Interaction Energies in Hydrogen Bonding between Purine and Pyrimidine Base Analogues. I. Interactions Involving 2,6-Diaminopurine 223

Ray, N. K., and P. T. Narasimhan: Unrestricted Hartree-Fock Calculation of Spin Distributions in Some Radical Anions Exhibiting Restricted Rotation about a Carbon Carbon Bond 306
Reinen, D.: Trigonale Kristallfelder in oxidischen Spinellverbindungen 260

Schmidtke, H.-H.: The Virial Theorem for Non-Coulombic Interactions and Scaled Approximate Wave Functions 376
Serre, Josiane, see Meyer, Amatzya Y. 117

Pagina

SEUNG, S., S., M. C. HARRISON, and I. G. CSIZMADIA: Non-Empirical LCAO-MO-SCF-CI Calculations on Organic Molecules with Gaussian Type Functions. Part III. Atomic Calculations 281
SIMONETTA, M., see CASALONE, G. L., C. MARIANI, and A. MUGNOLI 228
STOUT, E. W., see FLURRY, R. L., Jr., and J. J. BELL 203
STUART, THOMAS W., see ALLINGER, NORMAN L., and JULIA CHOW TAI 101

TAI, JULIA CHOW, see ALLINGER, NORMAN L., and THOMAS W. STUART 101
TINLAND, B.: SCF MO Calculations of Ultraviolet Electronic Spectra of Azanaphtalenes with the Variable β Approximation 361
TYUTYULKOV, N., F. FRATEV und D. PETKOV: Quantenchemische Untersuchung der Reaktionsfähigkeit von π-Elektronen-Systemen in angeregtem Singulett- und Triplettzustand. I. Änderungen der Basizität von konjungierten Aminen und N-haltigen Heteroaromaten in angeregtem Zustand 236

VEILLARD, A., B. LEVY, R. DAUDEL et F. GALLAIS: Structure électronique du borazane BH_3—NH_3 312
VORONIN, A. I., and V. A. KVLIVIDZE: Cross Sections for Transitions between Fine Structure Components of Second Group Excited Atoms Induced by Collisions with Noble Gas Atoms 334

ZERNER, M., and M. GOUTERMAN: Porphyrins. X. Extended Hückel Calculations on Alkaline Earth Complexes 26

Relationes

ARRIGHINI, G. P., and F. GROSSI: $1s1p$, $1s2p$, and $1s3p$ Hybrids in the H_2^+ Molecule . . 66
BLINDER, S. M., see ROTHSTEIN, S. M. 427
ČÍŽEK, J.: Some Comments on the Band Structure Calculations of Linear Chains in the Semiempirical SCF LCAO Crystal Orbital Approximation 175
DUKE, B. J.: Use of Orthogonal Functions in Non-Paired Spatial Orbital (NPSO) Wave Functions 87
FRATEV, F., s. TYUTYULKOV, N. 62
GROSSI, F., see ARRIGHINI, G. P. 66
GRÜNDLER, W., s. ISSLEIB, K. 70
ISSLEIB, K., u. W. GRÜNDLER: Zur Elektronenstruktur des Moleküls PH_5 70
KLASINC, L., D. SCHULTE-FROHLINDE, and M. RANDIĆ: Overlap Integrals of Clementi Orbitals for Bonds Involving Some First Row Atoms 358
LEIBOVICI, C.: Étude théorique de l'équilibre *cis* $\rightleftarrows$ *trans* entre les formes isomères de la *p*. benzoquinone dioxime 424
LIN, C. S.: Some Remarks on the Linear Dependence Problem in Variational Calculations 73
MAESTRO, M., R. MOCCIA, and G. TADDEI: Unidimensional Model for Optical Rotatory Power 80
MEYER, AMATZYA Y.: Pentatriafulvalenes 178
MOCCIA, R., see MAESTRO, M., and G. TADDEI 80
RANDIĆ, M., see KLASINC, L., and D. SCHULTE-FROHLINDE 358
ROTHSTEIN, S. M., and S. M. BLINDER: The Integral Hellmann-Feynman Theorem Applied to Hydrogen Peroxide 427
SATURNO, A. F.: Walsh's Rules for AH_4 Systems Derived from United Atom Molecular Orbitals 273
SCHULTE-FROHLINDE, D., see KLASINC, L., and M. RANDIĆ 358
SUCRE, M. G., et A. TALLET: Note sur le dimère d'éthylène en méthode de Hückel généralisée 277
SUREAU, A.: Sur le calcul des intégrales $R^k(n_a l_a\, n_b l_b,\, n_c l_c\, n_d l_d)$ de Slater à l'aide des fonctions d'onde hydrogénoides 76
TADDEI, G., see MAESTRO, M., and R. MOCCIA 80
TALLET, A., voir SUCRE, M. G. 277
TYUTYULKOV, N., u. F. FRATEV: Anhand der Methode der Konfigurationenwechselwirkung berechnete Dipolmomente einiger nichtalternierender Kohlenwasserstoffe in angeregtem Singulett- und Triplettzustand. II. Einfluß der Breite der Konfigurationenwechselwirkung 62

Pagina

Errata

BELL, J. J., see FLURRY, R. L. Jr., and E. W. STOUT 360
CASALONE, G. L., C. MARIANI, A. MUGNOLI, and M. SIMONETTA: Crystal, Molecular and Electronic Structure of 1,1-diaryl-2-halogenoethylenes. III. Semiempirical Calculations on the Crystal, Molecular and Electronic Structure of 2-bromo-1,1-diphenylprop-1-ene, Theoret. chim. Acta (Berl.) 8, 228 (1967) 433
FLURRY, R. L., Jr., E. W. STOUT, and J. J. BELL: The Inclusion of Non-nearest Neighbor β Terms in Pariser-Parr-Pople Type S.C.M.O. Calculations. II. Theoret. chim. Acta (Berl.) 8, 203 (1967) 360
MAESTRO, M., R. MOCCIA, and G. TADDEI: Unidimensional Model for Optical Rotatory Power. Theoret. chim. Acta 8, 80 (1967) 280
MARIANI, C., see CASALONE, G. L., A. MUGNOLI, and M. SIMONETTA 433
MOCCIA, R., see MAESTRO, M., and TADDEI, G. 280
MUGNOLI, A., see CASALONE, G. L., C. MARIANI, and M. SIMONETTA 433
SIMONETTA, M., see CASALONE, G. L., C. MARIANI, and A. MUGNOLI 433
STOUT, E. W., see FLURRY, R. L., Jr., and J. J. BELL 360
TADDEI, G., see MAESTRO, M., and R. MOCCIA 280

Recensiones

JØRGENSEN, C. K., J. B. NEILANDS, R. S. NYHOLM, D. REINEN, and R. J. P. WILLIAMS: Structure and Bonding, Volume 1 (Ref. H. KELM) 432
LÖWDIN, P. O.: Advances in Quantum Chemistry 1 (Ref. K. JUG) 181
— Advances in Quantum Chemistry 2 (Ref. K. JUG) 183
NEILANDS, J. B., see JØRGENSEN, J. B., R. S. NYHOLM, D. REINEN, and R. J. P. WILLIAMS 432
NYHOLM, R. S., see JØRGENSEN, C. K., J. B. NEILANDS, D. REINEN, and R. J. P. WILLIAMS 432
ORGEL, L. E.: An Introduction to Transition-Metal Chemistry: Ligand Field Theory (Ref. TH. RAMI) 431
REINEN, D., see JØRGENSEN, C. K., J. B. NEILANDS, R. S. NYHOLM, and R. J. P. WILLIAMS 432
SALEM, L.: The Molecular Orbital Theory of Conjugated Systems (Ref. C. J. BALLHAUSEN) 90
WILLIAMS, R. J. P., see JØRGENSEN, C. K., J. B. NEILANDS, R. S. NYHOLM, and D. REINEN 432

Theoretica Chimica Acta

In the interest of speedy publication this journal is issued at frequent intervals, according to the material received. As a rule 5 numbers constitute one volume. The price is DM 76. – per volumes.

Special attention is drawn to the fact that sole copyright for all languages and countries is transferred to the publishers immediately the manuscript is accepted and published by them. It is a fundamental condition that no manuscript submitted shall have been or will be published elsewhere either at home or abroad.

Unless special permission has been granted by the publishers, no photographic reproductions, microfilms, microphotos or other reproductions of a similar nature may be made of the journals, of individual contributions contained therein or of extracts therefrom.

The reproduction of registered names, trade marks, etc. in this journal, even if not specially indicated, does not warrant the assumption that such names, as defined by the laws affecting protection of trade marks, etc., may be regarded as uncontrolled and therefore for the free use of everybody.

Die Zeitschrift erscheint, um eine rasche Publikation zu ermöglichen, in einzelnen Heften, die zu Bänden vereinigt werden. Ein Band besteht im allgemeinen aus 5 Heften. Der Preis eines Bandes beträgt DM 76,—.

Grundsätzlich dürfen nur Arbeiten eingereicht werden, die vorher weder im Inland noch im Ausland veröffentlicht worden sind. Der Autor verpflichtet sich, sie auch nachträglich nicht an anderer Stelle zu publizieren. Mit der Annahme des Manuskriptes und seiner Veröffentlichung durch den Verlag geht das Verlagsrecht für alle Sprachen und Länder einschließlich des Rechts der fotomechanischen Wiedergabe oder einer sonstigen Vervielfältigung an den Verlag über. Jedoch wird gewerblichen Unternehmen für den innerbetrieblichen Gebrauch nach Maßgabe des zwischen dem Börsenverein des Deutschen Buchhandels e. V. und dem Bundesverband der Deutschen Industrie abgeschlossenen Rahmenabkommens die Anfertigung einer fotomechanischen Vervielfältigung gestattet. Wenn für diese Zeitschrift kein Pauschalabkommen mit dem Verlag vereinbart worden ist, ist eine Wertmarke im Betrage von DM 0,30 pro Seite zu verwenden. *Der Verlag läßt diese Beträge den Autorenverbänden zufließen.*

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in dieser Zeitschrift berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinn der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Afin d'assurer la publication la plus rapide possible, la revue paraît aux courts intervalles, dans la mesure des articels reçus. En genénérale un volume se compose de 5 fascicules. Le prix de chaque volume est de 76 DM.

L'attention est tout particulièrement attirée sur le fait qu'une fois le manuscrit accepté et publié par les éditeurs, l'unique copyright pour tous pays et toutes langues leur est réservé. Ne doivent être en principe envoyés que les ouvrages qui n'ont jamais été et ne seront jamais publiés ni dans le pays même de l'auteur ni à l'étranger.

En outre, il n'est pas permis sans l'autorisation expresse des éditeurs de faire des reproductions photographiques, des microfilms, des microphotos, etc. . . ., des revues publiées, des communications individuelles ou d'extraits de ces dernières.

La reproduction dans cette revue de marques déposées, marques de fabrique, désignations de marchandises, etc., même sans indication spéciale, n'autorise pas à croire que ces noms définis par la législation commerciale sur les marques et la propriété industrielle puissent être laissés au libre usage de chacun.

Pagina

Commentationes

TINLAND, B.: SCF MO Calculations of Ultraviolet Electronic Spectra of Azanaphtalenes with the Variable β Approximation 361

BÜTI, GY.: A Semiempirical Method for Treating Unsaturated Molecules in Terms of Electron Pair Functions 367

SCHMIDTKE, H.-H.: The Virial Theorem for Non-Coulombic Interactions and Scaled Approximate Wave Functions 376

CAPELLO, D., and A. PULLMAN: The Use of Improved Atomic Orbitals in the Evaluation of Zero-Field Splitting Integrals 383

DINER, S., J. P. MALRIEU, and P. CLAVERIE: The Use of Perturbation Methods for the Study of the Effects of Configuration Interaction. II. Variation of the 2^{na} Order Energy Correction in the Series of Linear Polyenes and Polyacenes 390

MALRIEU, J. P., P. CLAVERIE, and S. DINER: Use of Perturbation Methods for the Study of Configuration Interaction Effects. III. The Second Order Corrections to Transition Energies 404

Relationes

LEIBOVICI, C.: Étude théorique de l'équilibre *cis* $\rightleftarrows$ *trans* entre les formes isomères de la p. benzoquinone dioxime 424

ROTHSTEIN, S. M., and S. M. BLINDER: The Integral Hellmann-Feynman Theorem Applied to Hydrogen Peroxide 427

Recensiones

ORGEL, L. E.: An Introduction to Transition-Metal Chemistry: Ligand Field Theory (Ref. TH. RAMI) 431

JØRGENSEN, C. K., J. B. NEILANDS, R. S. NYHOLM, D. REINEN, and R. J. P. WILLIAMS Structure and Bonding (Ref. H. KELM) Volume 1 432

Erratum

CASALONE, G. L., C. MARIANI, A. MUGNOLI, and M. SIMONETTA: Crystal, Molecular and Electronic Structure of 1,1-diaryl-2-halogenoethylenes. III. Semiempirical Calculations on the Crystal, Molecular and Electronic Structure of 2-bromo-1,1-diphenylprop-1-ene. Theoret. chim. Acta (Berl.) 8, 228 (1967) 433

Springer-Verlag, Berlin · Heidelberg · New York

Druck: Carl Ritter & Co., Wiesbaden

Printed in Germany

Verantwortlich für den Anzeigenteil: Edgar Seidler, 1 Berlin 33, Heidelberger Platz 3